

рис. 1. Наиболее выгодные с энергетической точки зрения структуры молекул и анионов лимонной и α-кетаровой кислот

Измерение средних времен жизни молекулярных ОИ методом МСОИ ДЗЭ позволяет в приближении Аррениуса оценить сродство к электрону EA_a исследуемой молекулы:

$$EA_a = \frac{\ln(\tau_a/t_0) \cdot (Nk_B T + \varepsilon)}{N - \ln(\tau_a/t_0)},$$

где τ_a – время жизни, $t_0=5 \times 10^{-13}$ с – характерное время колебательной релаксации иона, $N=3n-6$ – число внутренних степеней свободы иона, k_B – постоянная Больцмана, ε – энергия захваченного электрона [4].

Сравнение полученных результатов с оценками величины сродства к электрону показывает, что возможно образование циклических структур анионов со связями О-Н-О, обладающих достаточно большим сродством к электрону, способным объяснить наблюдаемые в эксперименте величины времени жизни молекулярных отрицательных ионов.

Список публикаций:

- [8] Л. Физер, М. Физер. *Органическая химия*. Т. II. «Химия», М. 1970, 799 С.
- [9] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, A.S. Komolov, *Interconnection between dissociative electron attachment and electron-driven biological processes*. *Int. Rev. In Physical Chemistry*, 2018, V. 37, No. 1, P. 125-170.
- [10] M. P. Johansson, V. R. I. Kaila, D. Sundholm. *Ab Initio, Density Functional Theory, and Semi-Empirical Calculations. Biomolecular Simulations: Methods and Protocols, Methods in Molecular Biology*, Springer Science+Business Media New York 2013, V. 924, P. 3-27.
- [11] N. L. Asfandiarov, S. A. Pshenichnyuk, A. S. Vorob'ev1, E. P. Nafikova and A. Modelli. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 2015. V.29. P. 910–912.

Исследование продуктов синтеза системы «Молибден-углерод» методом рентгеновской дифрактометрии

Кононенко Полина Никаноровна

Пак Александр Яковлевич

Томский политехнический университет

Пак Александр Яковлевич, к.т.н.

pnk6@tpu.ru

В настоящее время карбиды молибдена представляют собой интерес благодаря такому свойству, как высокая каталитическая активность ввиду их схожести строения электронной структуры со структурой благородных металлов [1-3]. Данное свойство позволяет применять карбиды молибдена в качестве недорогих катализаторов в реакциях генерации водорода (HER) [4-5]. Данные материалы можно получить различными методами, например, методом температурно-программируемого карбидирования (ТПК) [1], карботермическим восстановлением [3] или само распространяющимся высокотемпературным синтезом (СВС) [6]. В данной работе используется электродуговой метод, основанный на синтезе материала при помощи электродуговой плазмы постоянного тока в условиях открытой воздушной среды. Полученный материал не окисляется, так как во время эксперимента происходит генерация СО и СО₂, которые экранируют зону формирования продукта синтеза. В настоящей работе представлены результаты экспериментов по получению карбидов молибдена и дальнейший анализ методом рентгеновской дифрактометрии. Особенностью работы является то, что продукты синтеза собирались в различных частях реакционной зоны, а именно, в виде порошка со стенок катода, в виде порошка со дна катода, а также в виде катодного депозита.

Экспериментальные исследования проводились на лабораторном плазменном реакторе, где графитовые электроды подключались к источнику постоянного тока. Анод выполнен в виде сплошного стержня, катод – в виде тигля, на дно которого помещалась смесь из микроразмерного молибдена и графита в соотношении

Mo:C=3:1. Электродуговой разряд поджигался при кратком соприкосновении анода с катодом, время разряда составляло ~11 сек, ток разрядного контура был равен ~170 А, расчетным путем была определена энергия дугового процесса ~45 кДж. Полученный порошок темно-серого цвета собирался с различных частей тигля - катода: со дна полости, со стенок, депозита и анализировался на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD-7000s, для проведения анализа использовалась база данных PDF4+.

Качественный рентгенофазовый анализ показал наличие следующих кристаллических фаз в полученном продукте: исходных реагентов Mo и C, а также следующие структуры карбида молибдена: $\text{Mo}_{1.2}\text{C}_{0.8}$ и Mo_2C . На рисунке 1 представлена гистограмма фазового состава продукта синтеза в зависимости от места его сбора в катод. Из гистограммы следует, что наибольший выход карбидов молибдена Mo_2C и $\text{Mo}_{1.2}\text{C}_{0.8}$ соответствует продукту, собранному со стенок катода.

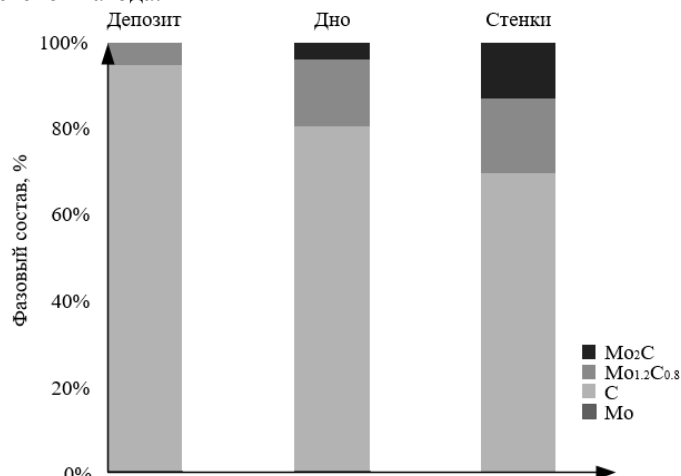


рис. 1 Гистограмма фазового состава продукта синтеза в зависимости от места его сбора в катод

Таким образом, была экспериментально доказана возможность получения карбидов молибдена безвакуумным электродуговым методом, а также показано влияние места сбора продукта на его фазовый состав.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (МК-633.2019.8).

Список публикаций:

- [1] Баженова М.Д., Гаврилова Н.Н. и др. // *Химическая промышленность сегодня*. 2014. № 1. С. 4.
- [2] Mehdad A., Jentoft E.R., et al. // *Catalysis Today*. 2019. V. 323. P. 112.
- [3] Macedo L.S., Haasterecht T., et al. // *Applied Catalysis B: Environmental*. 2019. V. 241. P. 81.
- [4] Wei H., Chen X. et. al. // *Adv. Sci.* 2018. V. 5(1700733). P. 1.
- [5] Guo J., Wang J., et al. // *Journal of Electroanalytical Chemistry*. 2017. V. 801. P. 7.
- [6] Зурначян А.Р., Манукян Х.В. и др. // *Химический журнал Армении*. 2011. № 64(13). С. 326.

Изучение фотоиницируемых процессов в диадах с Кетопрофеном методом ХПЯ

Кузнецова Полина Сергеевна

Институт химической кинетики и горения СО РАН

Лешина Татьяна Викторовна, д.х.н.

pol0596@yandex.ru

Интерес к реакционной способности хиральных соединений связан с их значительной ролью в биологии, химии и медицине. На сегодняшний день более половины лекарств на рынке содержат хиральные соединения в качестве активного вещества, при этом, в большинстве случаев используется рацемат, а не отдельные энантиомеры. Между тем известно, что терапевтические свойства энантиомеров многих лекарств существенно отличаются. Однако физические взаимодействия, лежащие в основе столь значительных различий в активности (S)- и (R)- энантиомеров, до сих пор не установлены. Вероятной причиной существования таких различий является то, что энантиомеры лекарств в живых системах взаимодействуют с другими хиральными соединениями — аминокислотами, которые располагаются в активных сайтах ферментов и рецепторов. Связывание лекарств с биомолекулами является определяющим фактором не только для действия лекарственного средства (как терапевтического, так и токсического), но также для транспорта и выведения лекарственного средства, которые регулируются различными транспортными белками. Детальное понимание